



TITLE:

7. 自己無撞着摂動法によるアンダーソン格子の状態密度(基研短期研究会「重い電子系の理論」報告,研究会報告)

AUTHOR(S):

金, 昌一; 倉本, 義夫; 糟谷, 忠雄

CITATION:

金, 昌一 ...[et al]. 7. 自己無撞着摂動法によるアンダーソン格子の状態密度(基研短期研究会「重い電子系の理論」報告,研究会報告). 物性研究 1986, 47(2): 149-152

ISSUE DATE:

1986-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92342>

RIGHT:

待値の計算には one-site 近似を用いた。この近似内で結果は Rice-Ueda と一致している。実際の系では軌道縮退があり、これを取入れることは今後の問題である。

最後に芳田奎氏と物性研の斯波弘行氏に多くの議論をしていただきました。深く感謝致します。

References

- 1) N. Read and D.M. Newns, Solid State Commun. **52** (1984), 993.
P. Coleman, Phys. Rev. **B29** (1984), 3035. See Reference of Ref. 3.
- 2) K. Yamada and K. Yosida, in “*Electron Correlation and Magnetism in Narrow Band Systems*”, ed. by T. Moriya (Springer-Verlag, Berlin, 1981) p210, and in “*Theory of Heavy Fermions and Valence Fluctuations*”, ed. by T. Kasuya and T. Saso (Springer - Verlag, Berlin, 1985) p183.
- 3) B. H. Brandow, Phys. Rev. **B33** (1986), 215.
- 4) T. M. Rice and K. Ueda, Phys. Rev. Lett. **55** (1985), 995, 2093.
- 5) C. M. Varma, W. Weber and L. J. Randall, Phys. Rev. **33** (1986), 1015.
- 6) P. Fazekas, to be published.
- 7) A. Yoshimori, Intern. J. Magnetism. **4** (1973), 93.

7. 自己無撞着摂動法による アンダーソン格子の状態密度

東北大・理, 工* 金 昌一, 倉本義夫*, 糟谷忠雄

高濃度近藤系の f 電子の特性は、高温において希薄系と類似の近藤効果を示すこと、低温において近藤状態間の干渉効果によって重い遍歴電子として振舞うことである。

本研究は高温からのアプローチとして、第1に近藤効果がサイト間相互作用によりどう影響されるか調べること、第2に1サイトの揺動状態から重い電子の状態へのクロスオーバーの性質を理解するねらいを持つ。そのためにフェルミ準位付近の電子状態だけではなく、近藤温度 T_K を含む広い範囲をカバーできる理論として、既に希薄系で成功を収めた自己無撞着摂動理論を格子系へ拡張した。

f 電子間の原子内クーロン斥力を無限大にした軌道縮退のないアンダーソン格子系を考える。あるサイト $\mathbf{R}_0 = 0$ に着目して、大分配関数 Z_f を $Z_N = Z_{N-1} Z_f$ (N : サイト数) で定義する。 Z_N は全系, Z_{N-1} はサイト \mathbf{R}_0 から f 状態を除いた仮想系の大分配関数である。このように考えると、1 サイト系の形式論が適用可能となる¹⁾。

サイト内過程については、Non-Crossing 近似 (NCA) を採用する。縮重度は $n=2$ であるが、 $T \gtrsim T_K$ では十分正確である。サイト間過程については、サイト \mathbf{R}_0 と相互作用する実効サイト数 z が 1 より十分大きいとして平均場近似を採用する。この近似の下では他のサイトとの相互作用はすべて有効混成強度

$$\widetilde{W}(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} V^2 \operatorname{Im} \langle 0 | \widetilde{G}_c(\varepsilon + i0) | 0 \rangle$$

にくりこまれる。ここで \widetilde{G}_c は仮想系の伝導電子のグリーン関数、 V は混成行列要素である。 \widetilde{G}_c を既知とすれば、NCA の積分方程式

$$R_0(z) = [z - \Sigma_0(z)]^{-1}$$

$$R_\sigma(z) = [z - \varepsilon_f - \Sigma_\sigma(z)]^{-1}$$

$$\Sigma_0(z) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon W(\varepsilon) f(\varepsilon) R_\sigma(z + \varepsilon)$$

$$\Sigma_\sigma(z) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon W(\varepsilon) [1 - f(\varepsilon)] R_0(z - \varepsilon)$$

から f^0 , f^1 状態に対応するリゾルベント R_0 , R_σ が求まる。ここで Σ_0 , Σ_σ は自己エネルギー、 $f(\varepsilon)$ はフェルミ分布関数、 ε_f は $4f$ 準位。リゾルベントが求まると、サイト \mathbf{R}_0 の伝導電子の T 行列は

$$T(i\varepsilon_n) = V^2 Z_f^{-1} \int_C \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} R_0(z) R_\sigma(z + i\varepsilon_n)$$

$$Z_f^{-1} = \int_C \frac{dz}{2\pi i} e^{-\beta z} [R_0(z) + 2R_\sigma(z)]$$

から求まる。ここで β は温度の逆数、 $i\varepsilon_n$ は松原振動数、 C は実軸を反時計回りに囲む積分路である。 \widetilde{G}_c は周期系の伝導電子のグリーン関数 G_c と

$$\langle 0 | G_c(z) | 0 \rangle$$

$$= \langle 0 | G_c(z) | 0 \rangle [1 + \Sigma_c(z) \langle 0 | G_c(z) | 0 \rangle]$$

という関係にある。ここで平均場近似に対応して、伝導電子の自己エネルギー Σ_c の \mathbf{k} 依存性は無視した。最後に T 行列から Σ_c が求まれば自己無撞着方程式は完全になる。 z が大きい極限では

$$T(z) = \Sigma_c(z) \left[1 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{z - \epsilon_{\mathbf{k}}} T(z) \right]$$

から Σ_c を決定することができる。

上記の方程式を数値的に解き f 電子、伝導電子の状態密度 $\rho_{\sigma}^f(\epsilon)$, $\rho_{\sigma}^c(\epsilon)$ (スピンあたり) を計算した。用いたパラメーターは、伝導電子の状態密度 ρ_0 としてバンド巾 $2D$ の矩形を取り、混成強度 $W_0 = \rho_0 V^2$, ($D = 10^4$ K, $\epsilon_f = -1500$ K, $\pi W_0 = 500$ K) を採用した。近藤温度は

$$T_K = D(nW_0/D)^{1/n} \exp(\epsilon_f/nW_0)$$

($n=2$) で評価すると、約 16 K である。次に計算結果を示す。

高温領域では、サイト間相互作用により、 $\rho_{\sigma}^f(\epsilon)$ の 2 つのピークは 1 サイト系あるいは Grewe 近似²⁾ (サイト間の相関を自己無撞着に扱わない近似) に比べて、有効 f 準位のピークは減少、近藤共鳴ピークは増大する (図 1)。これは T_K (1 サイト系) $<$ T_K (格子系) を意味する。温度の低下とともに近藤共鳴ピークは分裂し、擬ギャップがあらわれ成長する (図 2)。 $\rho_{\sigma}^c(\epsilon)$ についても同様である (図 3)。以上の結果は、有効混成強度がフェルミ準位付近で、温度の低下とともに増大することと密接に関係している (図 4)。また T_K よりかなり高温からサイト間相互作用の効果が利いたのは、縮重度が 2 だからである。

本理論の特徴は、 $1/n$, $1/z$ を小さいパラメーターとみなして、サイト内相関とサイト間相関を共に自己無撞着に扱う点にある。

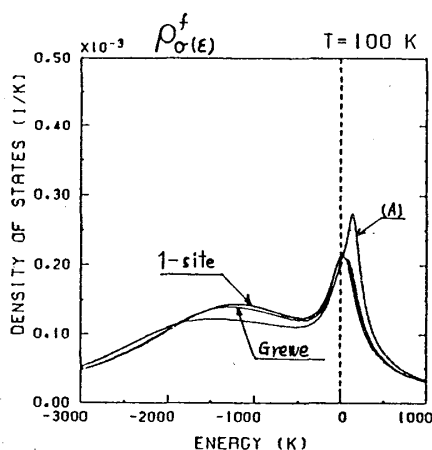


図 1

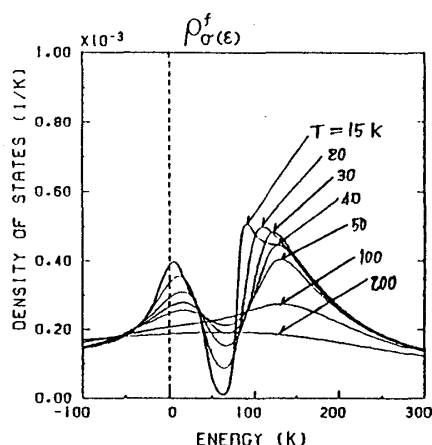


図 2

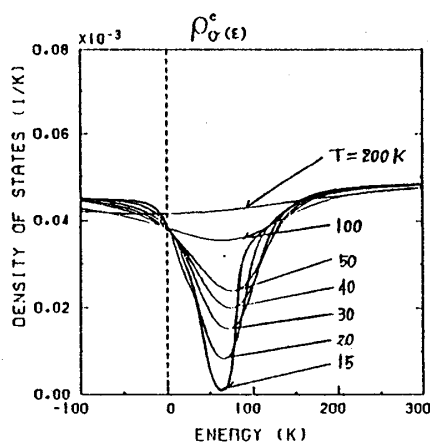


図 3

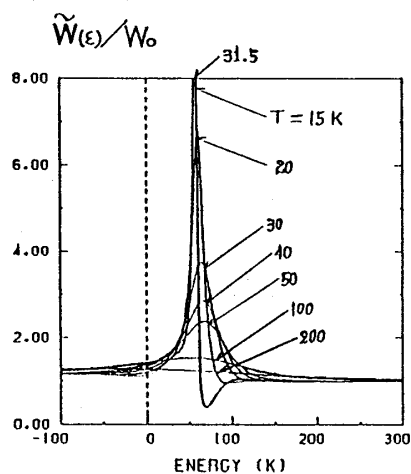


図 4

今後の課題として、 T_K よりも小さいコヒーレンス温度 T_{coh} がどのように現われるか縮重度を代えて、更に低温の計算を実行して調べる必要がある。

参 考 文 献

- 1) Y. Kuramoto: *Springer Series in Solid State Sciences* 62 (1985) 152.
- 2) N. Grewe: *Solid State Commun.* 50 (1984) 19.

8. 重い電子系の遍歴電子モデル

青学大・理工 金 徳 洲

重い電子系で観測されている非常に大きい電子比熱係数 γ の起因について、まだ意見は分かれている。意見の基本的な違いは、そもそも f 電子は局在しているのかどうかについてである。高温での磁化率の Curie-Weiss 的ふるまいが f 電子の局在性を示すものかと考えられているようであるが、必ずしもそうではない。Curie-Weiss 則は遍歴電子系についても, spinfluctuation や電子格子相互作用の機構から導かれるからである。

一方、重い電子系の物質に対してバンド計算が数多く行われている。その結果は、当然 3d 電子系よりはバンド幅はせまいが、しかし f 電子が通常の遍歴電子であり得る可能性を示唆している。また最近、 UPt_3 等で f 電子のフェルミ面が dHvA 振動によって観測され、その結